

Vilniaus universitetas

Matematikos ir informatikos fakultetas

Programų sistemų studijų programa

Optimizavimo metodų antrojo laboratorinio darbo ataskaita

Ataskaitą tikrino: Prof. Dr. Pranas Katauskis

Ataskaitą parengė: Dominykas Daunoravičius

Vilnius

2022

# Įvadas

**Laboratorinio darbo formulavimas:** Suprogramuoti gradientinio nusileidimo, greičiausiojo nusileidimo ir deformuojamo simplekso algoritmus. Apsirašyti tikslo funkciją taip, kad uždavinys būtų formuluojamas be apribojimų, apskaičiuoti tikslo ir gradiento funkcijų reikšmes taškuose X0 = (0,0), X1 = (1,1) ir Xm = (a/10, b/10), kur a = 3, b = 9. Vėliau minimizuoti suformuluotą uždavinį, naudojant suprogramuotus algoritmus, pradedant iš taškų X0, X1, Xm bei vizualizuoti tikslo funkciją ir bandymo taškus.

**Laboratorinio darbo tikslas:** Naudojantis suprogramuotais gradientinio nusileidimo, greičiausiojo nusileidimo ir deformuojamo simplekso algoritmais rasti tikslo bei gradiento funkcijų minimumus bei surasti kokie turėtų būti stačiakampio gretasienio formos dėžės matmenys, kad vienetiniam paviršiaus plotui jos tūris būtų maksimalus.

# Darbo eiga

Norint atlikti laboratorinį darbą, pirmiausiai reikėjo susirasti tikslo funkciją, išsireiškiant ją per vieną iš kintamųjų, kurį gavome iš paviršiaus ploto reikalavimo. Tuomet galima buvo susirasti gradiento funkciją, apsiskaičiuoti funkcijų reikšmes duotuose taškuose bei minimizuoti suformuluotą uždavinį pasinaudojant optimizavimo algoritmais.

Laikant kintamaisiais dėžės priekinės ir galinės sienų plotų sumą, šoninių sienų plotų sumą, viršutinės ir apatinės sienų plotų sumą reikėjo aprašyti vienetinio dėžės paviršiaus ploto reikalavimą ir dėžės tūrio pakelto kvadratu funkciją, vėliau iš vienetinio paviršiaus ploto reikalavimo išvesti vieno iš kintamųjų išraišką per kitus.

V2 = (abc)2, kur a,b,c – dežės kraštinių ilgiai.

x1 + x2 + x3 = 1, kur x1, x2, x3 – priešingų dėžės sienų plotų sumos.

x3 = 1 - x1 - x2

ab = 0.5x1, bc = 0.5x2, ac = 0.5x3

V2 = 0.5x1\* 0.5x2 \* 0.5 x3 = 0.125 \* x1\* x2 \* (1 - x1 - x2)

Gauta tikslo funkcija: f(X) = 0.125 \* x1 \* x2 \* (1 – x1 – x2)

Tam, kad gauti galutinio uždavinio atsakymą į klausimą kokia turėtų būti stačiakampio gretasienio  
formos dėžė, kad vienetiniam paviršiaus plotui jos tūris būtų maksimalus reikia spręsti optimizavimo uždavinį be apribojimų ir susidaryti min f(X). f(X) reikia padauginti iš -1, kad galėtume skaičiuoti funkcijos minimumą. Taigi tikslo funkcija, kurią naudosime uždavinyje yra:

**f(X) = -0.125 \* x1 \* x2 \* (1 – x1 – x2)**

Chart

Description automatically generated

*1 pav. Tikslo funkcijos grafikas*

Gauta gradiento funkcija: ∇f(X) = (0.125 \* x2 \* (2x1 + x2 -1), 0.125 \* x1 \* (x1 + 2x2 -1))

Gavę šia funkciją galime apsiskaičiuoti tikslo ir gradiento funkcijų reikšmes taškuose: X0 = (0,0),  
X1 = (1,1), Xm = (0.3,0.9).

Tikslo ir gradiento funkcijų reikšmės taške (0, 0): f(X) = 0.0, ∇f(X) = [0.0, 0.0]  
Tikslo ir gradiento funkcijų reikšmės taške (1, 1): f(X) = 0.125, ∇f(X) = [0.25, 0.25]  
Tikslo ir gradiento funkcijų reikšmės taške (0.3, 0.9): f(X) = 0.00675 , ∇f(X) = [0.05625, 0.04125]

Pasirinkta programavimo kalba: Python.

# Metodų aprašymas bei analizė

## Gradientinio nusileidimo metodas

Gradientinis nusileidimas yra optimizavimo metodas, besiremiantis tuo, kad skaliarinio lauko gradientas visada rodo greičiausio lauko augimo kryptį, o antigradientas mažėjimo kryptį. Gradientinio nusileidimo žingsnis skaičiuojamas pasinaudojant formule: Xi+1 = Xi − γ∇f(Xi), vėliau tikriname ar gradientas yra pakankamai mažas ir jei taip, tai skaičiavimus baigiame, jei ne - skaičiuojame kitą žingsnį.

Naudojant gradientinio nusileidimo metodą ir parametrus: gamma = 1, epsilon = 0.001, bei pradinį tašką X0(0,0) skaičiuojame minimumo tašką.

Chart, diagram

Description automatically generated

2 pav. Gradientinio nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X0(0,0), gamma = 1, epsilon = 0.001

Gavome, kad minimumui gauti mūsų funkcijai prireikė 1 iteracijos ir 2 funkcijų skaičiavimų. Grafike vaizduojamas mėlynas „x“ žymi, jog tai yra paskutinė iteracija ir rastas minimumo taškas.

1 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai, kai pradinis taškas X0(0,0), gamma = 1, epsilon = 0.001

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | F(X0) |
| 1 | 0 | 0 | 0 |

Pasirinkus bet kokį kitą gamma ar epsilon gradientinis nusileidimo metodas taip pat randa minimumo tašką per 1 iteraciją ir 2 funkcijų skaičiavimus dėl to, jog X0(0,0) ir yra minimumo taškas.

Toliau pasirinkam pradinį tašką X1(1,1) ir gamma = 1.

Chart

Description automatically generated

3 pav. Gradientinio nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X1(1,1), gamma = 1, epsilon = 0.001

Gavome, kad minimumui gauti mūsų funkcijai prireikė 25 iteracijų ir 50 funkcijų skaičiavimų. Grafike vaizduojamas violetinis „x“ žymi, jog tai yra paskutinė iteracija ir rastas pakankamo tikslumo (epsilon = 0.001) minimumo taškas. Grafike pavaizduoti taškai tik po 12, 14, 16, 18, 25 iteracijų, jog grafike aiškiai matytųsi artėjimas link minimumo.

2 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai po pirmų ir paskutinių trijų iteracijų, kai pradinis taškas X1(1,1), gamma = 1, epsilon = 0.001

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | F(X1) |
| 1 | 0.75 | 0.75 | 0.03515625 |
| 2 | 0.6328125 | 0.6328125 | 0.013296246528625488 |
| 3 | 0.5617446899414062 | 0.5617446899414062 | 0.00487099377328859 |
| 23 | 0.3422901505128752 | 0.3422901505128752 | -0.004619421918670533 |
| 24 | 0.34114046415018706 | 0.34114046415018706 | -0.004621891754503968 |
| 25 | 0.34014171606373356 | 0.34014171606373356 | -0.004623756471132563 |

Bandom keisti tik gamma reikšmė į 3.

Chart

Description automatically generated

4 pav. Gradientinio nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X1(1,1), gamma = 3, epsilon = 0.001

Gavome, kad minimumui gauti mūsų funkcijai prireikė 8 iteracijų ir 16 funkcijų skaičiavimų. Grafike vaizduojamas violetinis „x“ žymi, jog tai yra paskutinė iteracija ir rastas pakankamo tikslumo (epsilon = 0.001) minimumo taškas. Grafike pavaizduoti taškai tik po 2, 3, 4, 5, 8 iteracijų, jog grafike aiškiai matytųsi artėjimas link minimumo.

3 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai po pirmų ir paskutinių trijų iteracijų, kai pradinis taškas X1(1,1), gamma = 3, epsilon = 0.001

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | F(X1) |
| 1 | 0.25 | 0.25 | -0.00390625 |
| 2 | 0.2734375 | 0.2734375 | -0.004234910011291504 |
| 3 | 0.29186248779296875 | 0.29186248779296875 | -0.004432481462648963 |
| 6 | 0.32153131484142505 | 0.32153131484142505 | -0.004612629643396381 |
| 7 | 0.3258003731803469 | 0.3258003731803469 | -0.0046226433089225655 |
| 8 | 0.328561394562967 | 0.328561394562967 | -0.004626810370607299 |

Bandom toliau didint gamma reiksmę į 5.

Chart

Description automatically generated

5 pav. Gradientinio nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X1(1,1), gamma = 5, epsilon = 0.001

Tačiau toliau didinant gamma reikšmę metodui nebepavyko rasti minimumo iš šio pradinio taško, sunaudojo maksimalų kiekį iteracijų (1000) ir suskaičiavo 2000 funkcijų reikšmių ir tolo nuo minimumo, tai programa turėjo baigti darbą. Grafike pavaizduoti taškai tik po 1, 2, 3, 4 iteracijų. Grafike matosi kaip funkcija staigiai arteja link minus begalybės

4 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai po šešių iteracijų, kai pradinis taškas X1(1,1), gamma = 5, epsilon = 0.001

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | F(X1) |
| 1 | -0.25 | -0.25 | -0.01171875 |
| 2 | -0.5234375 | -0.5234375 | -0.07010209560394287 |
| 3 | -1.3643112182617188 | -1.3643112182617188 | -0.8675316378746868 |
| 4 | -5.707027792690496 | -5.707027792690496 | -50.54098174517351 |
| 5 | -70.34298183788785 | -70.34298183788785 | -87635.16114617664 |
| 6 | -9392.060646446731 | -9392.060646446731 | -207131329650.32285 |
| ... |  |  |  |

Bandom gamma mažint pakeitus į 0.5.

Chart, scatter chart

Description automatically generated

6 pav. Gradientinio nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X1(1,1), gamma = 0.5, epsilon = 0.001

Gavome, kad minimumui gauti mūsų funkcijai prireikė 53 iteracijų ir 106 funkcijų skaičiavimų. Grafike vaizduojamas raudonas „x“ žymi, jog tai yra paskutinė iteracija ir rastas pakankamo tikslumo (epsilon = 0.001) minimumo taškas. Grafike pavaizduoti taškai tik po 20, 30, 40, 53 iteracijų, jog grafike aiškiai matytųsi artėjimas link minimumo.

5 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai po pirmų ir paskutinių trijų iteracijų, kai pradinis taškas X1(1,1), gamma = 0.5, epsilon = 0.001

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | F(X1) |
| 1 | 0.875 | 0.875 | 0.07177734375 |
| 2 | 0.7861328125 | 0.7861328125 | 0.04420786281116307 |
| 3 | 0.7193902134895325 | 0.7193902134895325 | 0.028384830833357855 |
| 51 | 0.3411909837454413 | 0.3411909837454413 | -0.004621790507800677 |
| 52 | 0.3406883038440598 | 0.3406883038440598 | -0.004622768212858388 |
| 53 | 0.34021847526378685 | 0.34021847526378685 | -0.004623622384357211 |

6 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatų su pradiniu tašku X1(1,1) palyginimas, epsilon = 0.001

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | gamma = 0.5 | gamma = 1 | gamma = 3 | gamma = 5 |
| Iteracijų skaičius | 53 | 25 | 8 | 1000 |
| Skaičiuotų funkcijų kiekis | 106 | 50 | 16 | 2000 |
| Minimumo X reikšmė | (0.34021847526378685, 0.34021847526378685) | (0.34014171606373356, 0.34014171606373356) | (0.328561394562967, 0.328561394562967) | Nepasiektas |
| Funkcijos minimumo reikšmė | -0.004623622384357211 | -0.004623756471132563 | -0.004626810370607299 | Nepasiektas |
| Apytikslis atstumas iki realaus Xmin | (0.00689, 0.00689) | (0.00681, 0.00681) | (0.00477, 0.00477) | - |

Reali Xmin reikšmė = (1/3, 1/3).

Gradientinio nusileidimo metodui skaičiuojant tikslo funckijos f(X) = -0.125 \* x1 \* x2 \* (1 – x1 – x2)minimumo tašką, bandymais atrasta, jog renkantis gamma per mažą, metodui prireikia daug iteracijų ir funkcijų skaičiavimų atrasti minimui, o pasirinkos gamma per daug didelį, metodas neberanda minimumo. Bandimuose optimaliausia gmma reikšmė buvo 3, su ja prireikė tik 8 iteracijų ir 16 funkcijų skaičiavimų, taip pat atstumas iki realaus Xmin mažiausias.

Toliau atliekam skaičiavimus su gamma = 3, o pradinį tašką keičiam į X2(0.3,0.9).

Chart

Description automatically generated

7 pav. Gradientinio nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X2(0.3,0.9), gamma = 3, epsilon = 0.001

Gavome, kad minimumui gauti mūsų funkcijai prireikė 16 iteracijų ir 32 funkcijų skaičiavimų. Grafike vaizduojamas rausvas „x“ žymi, jog tai yra paskutinė iteracija ir rastas pakankamo tikslumo (epsilon = 0.001) minimumo taškas. Grafike pavaizduoti taškai tik po 8, 9, 10, 11, 12, 13, 16 iteracijų, jog grafike aiškiai matytųsi artėjimas link minimumo.

7 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai po pirmų ir paskutinių trijų iteracijų, kai pradinis taškas X1(1,1), gamma = 0.5, epsilon = 0.001

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | F(X2) |
| 1 | 0.13125 | 0.77625 | -0.0011780200195312504 |
| 2 | 0.11997011718750002 | 0.7425966796875 | -0.001530480384372479 |
| 3 | 0.12483312830035687 | 0.7153711047372007 | -0.0017837604553312182 |
| 14 | 0.24330667998275995 | 0.46321449094417533 | -0.004134499659155903 |
| 15 | 0.2520218549204253 | 0.4477278083074742 | -0.004234925640417196 |
| 16 | 0.26011931709946806 | 0.4337899785817296 | -0.004317300454129901 |

Rastas minimumas yra gerokai toliau realaus minimumo taško (1/3, 1/3), dėl to bandom mažinti epsilon į 0.0001.

Chart

Description automatically generated

8 pav. Gradientinio nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X2(0.3,0.9), gamma = 3, epsilon = 0.0001

Gavome, kad minimumui gauti mūsų funkcijai prireikė 28 iteracijų ir 56 funkcijų skaičiavimų. Grafike vaizduojamas violetinis „x“ žymi, jog tai yra paskutinė iteracija ir rastas pakankamo tikslumo (epsilon = 0.0001) minimumo taškas. Grafike pavaizduoti taškai tik po 18, 19, 20, 21, 28 iteracijų, jog grafike aiškiai matytųsi artėjimas link minimumo.

8 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai po pirmų ir paskutinių trijų iteracijų, kai pradinis taškas X1(1,1), gamma = 0.5, epsilon = 0.0001

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | F(X2) |
| 1 | 0.13125 | 0.77625 | -0.0011780200195312504 |
| 2 | 0.11997011718750002 | 0.7425966796875 | -0.001530480384372479 |
| 3 | 0.12483312830035687 | 0.7153711047372007 | -0.0017837604553312182 |
| 26 | 0.31064284149178367 | 0.358825799207017 | -0.004605403573192116 |
| 27 | 0.3133190339785361 | 0.35552974975298135 | -0.004611042164246589 |
| 28 | 0.31569648571869646 | 0.35266540279254016 | -0.004615375606789164 |

Bandom toliau mažinti epsilon į 0.00001.

Chart

Description automatically generated

9 pav. Gradientinio nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X2(0.3,0.9), gamma = 3, epsilon = 0.00001

Gavome, kad minimumui gauti mūsų funkcijai prireikė 37 iteracijų ir 74 funkcijų skaičiavimų. Grafike vaizduojamas violetinis „x“ žymi, jog tai yra paskutinė iteracija ir rastas pakankamo tikslumo (epsilon = 0.00001) minimumo taškas. Grafike pavaizduoti taškai tik po 18, 20, 21, 27, 37 iteracijų, jog grafike aiškiai matytųsi artėjimas link minimumo.

9 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai po pirmų ir paskutinių trijų iteracijų, kai pradinis taškas X1(1,1), gamma = 0.5, epsilon = 0.00001

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | F(X2) |
| 1 | 0.13125 | 0.77625 | -0.0011780200195312504 |
| 2 | 0.11997011718750002 | 0.7425966796875 | -0.001530480384372479 |
| 3 | 0.12483312830035687 | 0.7153711047372007 | -0.0017837604553312182 |
| 35 | 0.32619335015898693 | 0.3407497857248024 | -0.004627421885437685 |
| 36 | 0.3270703780003281 | 0.33980876827279605 | -0.004627939018970874 |
| 37 | 0.3278413797643666 | 0.33898848624583305 | -0.004628335076905019 |

10 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatų su pradiniu tašku X2(0.3,0.9) palyginimas, gamma = 3

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | epsilon = 0.001 | epsilon = 0.0001 | epsilon = 0.00001 |
| Iteracijų skaičius | 16 | 28 | 37 |
| Skaičiuotų funkcijų kiekis | 32 | 56 | 74 |
| Minimumo X reikšmė | (0.26011931709946806, 0.4337899785817296) | (0.31569648571869646, 0.35266540279254016) | (0.3278413797643666, 0.33898848624583305) |
| Funkcijos minimumo reikšmė | -0.004317300454129901 | -0.004615375606789164 | -0.004628335076905019 |
| Apytikslis atstumas iki realaus Xmin | (0.07321, 0.10046) | (0.01764, 0.01933) | (0.00549, 0.00566) |

Reali Xmin reikšmė = (1/3, 1/3).

Gradientinio nusileidimo metodui skaičiuojant tikslo funckijos f(X) = -0.125 \* x1 \* x2 \* (1 – x1 – x2)minimumo tašką, bandymais atrasta, jog renkantis su per dideli epsilon atstumas iki realaus Xmin yra labai netikslus, sumažinus epsilon net iki 0.00001, rasta, jog atstumas iki realaus Xmin yra (0.00549, 0.00566), o tai yra panašus, bet ne toks tikslus, kaip atstumas (0.00477, 0.00477) rastas skaičiuojant X1(1,1) su gamma = 3, epsilon = 0.001. Matome, kaip pradedant nuo skirtingų taškų, ieškant su tokiu pačiu epsilon, galima prarasti tikslumą.

## Greičiausiojo nusileidimo metodas

Greičiausio nusileidimo metodo idėja yra eiti nusileidimo kryptimi iki pirmo lokaliojo minimumo šia kryptimi. Kiekvienam žingsniui apskaičiuoti naudojama formulė: Xi+1 = Xi − arg min γ≥0 f(Xi − γ · ∇f(Xi))∇f(Xi), kaip ir gradientinio nusileidimo metode, pasiekus atitinkamą tikslumą mūsų funkcija baigia darbą.

Norint apskaičiuoti šią formulė mums reikėjo gauti gamma, kuriai gauti būtų naudojamas vienas iš trijų 1 laboratoriniame darbe aptartų algoritmų: intervalo dalijimo pusiau, auksinio pjūvio ar Niutono metodas. Pasirinkau Niutono metodą.

Naudojant greičiausiojo nusileidimo metodą, Niutono metodą ir parametrus: epsilon = 0.001, bei pradinį tašką X0(0,0) skaičiuojame minimumo tašką.

Chart

Description automatically generated

10 pav. Greičiausiojo nusileidimo grafiko ir taškų vaizdavimas, pradinis taškas X0(0,0), epsilon = 0.001

Gavome, kad minimumui gauti mūsų funkcijai prireikė 1 iteracijos ir 2 funkcijų skaičiavimų. Grafike vaizduojamas mėlynas „x“ žymi, jog tai yra paskutinė iteracija ir rastas minimumo taškas.

11 lentelė. Gradientinio nusileidimo metodo rezultatai, kai pradinis taškas X0(0,0), epsilon = 0.001

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Iteracija | x0 | x1 | gamma | F(X0) |
| 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Pasirinkus bet kokį kitą epsilon greičiausiojo nusileidimo metodas taip pat randa minimumo tašką per 1 iteraciją ir 2 funkcijų skaičiavimus dėl to, jog X0(0,0) ir yra minimumo taškas.

Toliau pasirinkam pradinį tašką X1(1,1).